非Ohm性電流の運動学的理論

康　舜　沢（京大理）

（6月30日受理）

§1. 序

真性半導体においてかけられた電場が強くなった場合には，電気伝導特性は通常のOhm電流からずれることはよく知られており，実験的にも理論的にもすでにいくつかの研究がなされている。電場の強さに応じてOhm電流からのずれ方が変ることが分っている。電場を次才に強くしていけば，はじめはOhm電流次に電場に関して1次以下の巾に比例する電流およびある電場の強さ以上のところでは，電流は飽和することが実験的にわかっている。

一方，電気伝導のような輸送現象を微視的な立場からとりあつかう理論的な方法は，古典的にも量子論的にもOhm電流に関しては，ある意味で確立されているとみなされるに反し，非Ohm電流に関しては一般的な手法はいまだ得られていないのが現状であるといえるだろう。

古典論の適用できる非縮退的な電子系をもった物質に対しては，一般的な方法としてBoltzmannの分布函数の方法があり，これは電子系の分布函数を問題にする限りでは，原理的には線型（Ohm電流）あるいは，非線型（非Ohm性電流）に限らず，一般的な適用性をもっているといえる。量子効果が無視できないような場合には，電子と電場との相互作用のHamiltonianを摂動としてとりあつかって，これに関して一次の計算結果が線型電流の輸送係数を与え，非Ohm電流は摂動の二次以上の高次の項から得られる。しかしながらこの方法は，摂動論に基いているが故にその適用範囲にはそれなりの限度があり，電場が強くなると使えなくなる。

上にのべたようにBoltzmannの方法は一般的な適用性をもっているという利点の故に，これまでの非線型電気伝導理論で主要な役割をはたしてきた。しかしながらこの方法に関しても困難がないわけではない。というのは，非線型効

果，即ちOhm電流からのずれが弱い場合にはBoltzmannの輸送方程式を解くことは困難ではないが，非線型効果が大きくなるにしたがって困難が増大し，計算機を用いてもその能力には限度がある。

こういう意味で，何かこの外に原理的で実際的にも一般的な適用性をもった理論的な方法が要求されるのであるが，そういうものは見出されていない。

ただ，直接分布函数にうつたえないで，電流が飽和される以前の非線型効果をとりあつかう理論がいくつかある。その中興味あるものとしてShockleyの電子温度の概念を用いる方法[1]と，黒沢の電子計算機によるシミュレーションの方法[2]とをあげることができる。

Shockleyは格子系の温度（T_L）と異る電子系の温度（T_e）という概念を導入してOhm電流が流れるときは$T_e = T_L$であるが，電場が強くなり非Ohm性の電流が流れるところでは，$T_e > T_L$となる（この場合の電子がhot electronとよばれる）ものとして，エネルギー・バランスの式と，電子・格子相互作用によって，電子がフォノンと衝突して失うエネルギーの表式とから簡単に$E^{1/2}$（Eは電場の強さ）に比例する電流を導びきだすことができた。電子温度という概念を用いて簡単に非線型電流を導いたという意味で興味あり有用であるけれども，電子温度という概念がどれだけの真実性をもって実際の電子状態を反映しているかという点が，微視的な立場からは問題となる。このような点をより定量的に吟味しようとするものに上でのべたBoltzmannの輸送方程式によるもの[3]がある。

黒沢は何らかの巨視的な意味での仮定を用いずに，いづれかの伝導電子に着目して，それの他の電子との相関を無視して格子振動（フォノン）との多数回の衝突にわたる行動を電子計算機を用いて可能なかぎり追跡して非線型特性を示す，電子系の状態をしらべようとする。これの結果のくわしい内容はまだ目にかかれないので，ここではこういう方法が用いられているということだけふれておいた。

この論文では電子温度というような概念と，電子計算機のどちらの助けをもかりずに，どちらかというと上記の黒沢の立場に近い方法で，いくつかの仮定のもとに非線型電流を理論的に導びきだそうとする。

この場合，伝導電子間の相関を無視した上で，どれか一つの電子に着目して

それの充分多数回の継続しておこる衝突にわたる平均的なふるまいをしらべる。

§2. 電流及びジュール熱の表式

伝導電子は電場によって加速され，フォノンとの衝突によりエネルギーの一部を失い，減速されるものと考えられる。この伝導電子の多数回の衝突にわたる平均の速度が観測される電流に対応する易動度を与えるものと考える。この場合，衝突によって失われた伝導電子のエネルギーは，格子の熱振動エネルギーに転化するものと考える。又，衝突からその次の衝突のおこる間では，電子は，外部電場による加速力のみをうけるものとする。すべての伝導電子は，質量が m で荷電が e であらわされるとする。

いま，どれか一つの電子に着目して，それの Collsion duration を無視して i ($i=1,\ 2,\ \cdots\cdots\ N$) 番目の衝突のおこる時刻を t_i とし，$t_i < t < t_{i+1}$ なる時間でのこの伝導電子の速度を $V_i(t)$ で表わし，i 番目の衝突直後のこの電子の速度を V_{i0} で表わすことにする。

以上のことを念頭において，外部よりかけられた静電場を E であらわせば

$$m\frac{dV_i(t)}{dt} = eE \tag{1}$$

がなりたつことがわかる。

(1)を時間に関して1回積分すれば

$$V_i(t) = V_{i0} + \frac{e}{m}E\,(t - t_i) \tag{2}$$

がえられる。

i 番目と $i+1$ 番目の衝突の間におけるこの電子の平均の速度を $\overline{V}_i$ で表わせば

$$\overline{V}_i = \int_{t_i}^{t_{i+1}} V_i(t)\,dt \Big/ \int_{t_i}^{t_{i+1}} dt$$

$$= V_{i0} + \frac{eE}{2m}(t_{i+1} - t_i) \tag{3}$$

となる。

さらに1番目からN番目までの衝突にいたるまでの（ここで1番目の衝突と

しては電場がかけられた後の一定の時間が経過したときにおこるどれかの衝突をえらべばよい）この電子の単位時間あたりの平均の速度を$\langle V\rangle_N$で表わすと

$$\langle V\rangle_N=\frac{\sum_{i=1}^{N-1}\overline{V}_i\,(t_{i+1}-t_i)}{\sum_{i=1}^{N-1}(t_{i+1}-t_i)}$$

$$=\frac{1}{\sum_{i=1}^{N-1}(t_{i+1}-t_i)}\left\{\sum_{i=1}^{N-1}\frac{eE}{2m}(t_{i+1}-t_i)^2+\sum_{i=1}^{N-1}V_{i0}(t_{i+1}-t_i)\right\}$$

$$=\frac{eE}{2m}\sum_{i=1}^{N-1}(t_{i+1}-t_i)^2\Big/\sum_{i=1}^{N-1}(t_{i+1}-t_i)+ne\sum_{i=1}^{N-1}V_{i0}(t_{i+1}-t_i)\Big/\sum_{i=1}^{N-1}(t_{i+1}-t_i) \tag{4}$$

となる。仮定によりNを単位体積あたりの伝導電子の数程度の大きさにとった場合，電流の表式は

$$J=ne\langle V\rangle_N$$

$$=\frac{ne^2E}{2m}\sum_{i=1}^{N-1}(t_{i+1}-t_i)^2\Big/\sum_{i=1}^{N-1}(t_{i+1}-t_i)+ne\sum_{i=1}^{N-1}V_{i0}(t_{i+1}-t_i)\Big/\sum_{i=1}^{N-1}(t_{i+1}-t_i) \tag{5}$$

となる。

エネルギーに関していえば，電子は電場によって加速され運動エネルギーを増加し，衝突によってその一部を失い減速される。$i+1$番目の衝突によって電子の失うエネルギーを$\triangle\varepsilon_i$と表わすと

$$\triangle\varepsilon_i=\frac{1}{2}m\{V_i(t_{i+1})\}^2-\frac{1}{2}mV_{i+1,0}^2$$

$$=\frac{e^2E^2}{2m}(t_{i+1}-t_i)^2+eEV_{i0}(t_{i+1}-t_i)+\frac{m}{2}(V_{i+1,0}^2-V_{i,0}^2) \tag{6}$$

となる。

1番目からN番目までのN回の衝突にわたる単位時間あたりの平均のエネル

ギー散逸を$\langle\triangle\varepsilon\rangle_N$で表わせば，式(6)を用いて

$$\langle\triangle\varepsilon\rangle_N = \frac{\sum_{i=1}^{N-1}\triangle\varepsilon_i}{\sum_{i=1}^{N-1}(t_{i+1}-t_i)}$$

$$= eE\Big\{\frac{eE}{2m}\sum_{i=1}^{N-1}(t_{i+1}-t_i)^2\Big/\sum_{i=1}^{N-1}(t_{i+1}-t_i)+\sum_{i=1}^{N-1}V_{i0}(t_{i+1}-t_i)$$

$$\Big/\sum_{i=1}^{N-1}(t_{i+1}-t_i)+\frac{m}{2}\sum_{i=1}^{N-1}(V_{i+1,0}^2-V_{i,0}^2)$$

$$\Big/\sum_{i=1}^{N-1}(t_{i+1}-t_i)\Big\}$$

$$= eE\langle V\rangle_N+\frac{m}{2}\sum_{i=1}^{N-1}(V_{i+1,0}^2-V_{i,0}^2)\Big/\sum_{i=1}^{N-1}(t_{i+1}-t_i) \tag{7}$$

となることがわかる。ここでNは充分大きいので

$$\sum_{i-1}^{N-1}V_{i+1,0}^2 = \sum_{i=1}^{N-1}V_{i,0}^2 \tag{8}$$

とおくことができて，結局

$$\langle\triangle\varepsilon\rangle_N = eE\langle V\rangle_N \tag{9}$$

となる。したがって単位体積あたりの伝導電子の単位時間あたりの平均のエネルギー散逸$\triangle\varepsilon$は

$$\begin{aligned}\triangle\varepsilon &= n\langle\triangle\varepsilon\rangle_N\\ &= ne\langle V\rangle_N E\\ &= J\cdot E\end{aligned} \tag{10}$$

で与えられる。これが即ちジュール熱に他ならない。

§3. 非Ohm性電流の導出

ここで次の仮定をする。

(I) 衝突による散乱は等方的で，衝突直後の速度$V_{i,0}$は random variable

である。

仮定(I)のもとで電流の式(5) の性質をしらべる。

仮定(I)によれば，式(5)

$$J=\frac{ne^2E}{2m}\sum_{i=1}^{N-1}(t_{i+1}-t_i)^2\Big/\sum_{i=1}^{N-1}(t_{i+1}-t_i)+ne\sum_{i=1}^{N-1}V_{i,0}(t_{i+1}-t_i)\Big/\sum_{i=1}^{N-1}(t_{i+1}-t_i)$$

において，右辺才2項は

$$\sum_{i=1}^{N-1}V_{i,0}(t_{i+1}-t_i)=0$$

となるとみなせるので，電流の表式は

$$\begin{aligned}J&=\frac{ne^2E}{2m}\sum_{i=1}^{N-1}(t_{i+1}-t_i)^2\Big/\sum_{i=1}^{N-1}(t_{i+1}-t_i)\\&=\frac{ne^2E}{2m}\sum_{i=1}^{N-1}(\triangle t_i)^2\Big/\sum_{i=1}^{N-1}\triangle t_i\end{aligned}\tag{11}$$

となる。ここで

$$\triangle t_i\equiv t_{i+1}-t_i\tag{12}$$

とおいた。

いま，電場方向をX軸にとれば，式(2)から

$$V_{ix}(t)=V_{i,0x}+\frac{e}{m}E\,(t-t_i)$$

がえられる。ここに $V_{ix}(t)$，$V_{i,0x}$ はそれぞれ $V_i(t)$，$V_{i,0}$ のX軸方向の成分である。Eは電場の大きさを表わす。

この式をさらに時間に関してもう1回積分すれば

$$X_i(t)=X_{i,0}+V_{i,0x}(t-t_i)+\frac{e}{2m}E(t-t_i)^2\tag{13}$$

がえられる。$X_i(t)$，$X_{i,0}$ はそれぞれ $t_i<t<t_{i+1}$ なる時刻における，電子の座標のX成分，および i 番目の衝突がおこる位置の座標のX成分を表わす。

式 (13) から考えている電子が i 番目と $i+1$ 番目の衝突の間に動く距離のX軸方向への射影 ℓ_{ix} は

$$\ell_{ix} = X_i(t_{i+1}) - X_{i,o}$$

$$= V_{i,ox}\triangle t_i + \frac{eE}{2m}(\triangle t_i)^2 \qquad (14)$$

で与えられる。

式 (14) を $\triangle t_i$ に関する2次方程式とみなして，$\triangle t_i$ に関して解けば

$$\triangle t_i = \frac{-V_{i,ox} \pm \sqrt{V_{i,ox}^2 + 2eE\ell_{ix}/m}}{(eE/m)}$$

がえられる。しかるに $\triangle t_i > 0$ であるから，複号のうち＋だけをとるべきである。故に

$$\triangle t_i = \frac{-V_{i,ox} + \sqrt{V_{i,ox}^2 + 2eE\ell_{ix}/m}}{eE/m} \qquad (15)$$

となる。

式 (15) を用いれば，電流の表式 (11) は，次のように表わすことができる。

$$J = \frac{ne^2E}{2m} \frac{\sum_{i=1}^{N-1}\left\{\frac{2m\ell_{ix}}{eE} + 2\left(\frac{mV_{i,ox}}{eE}\right)^2\right\} - \sum_{i=1}^{N-1}\frac{2mV_{i,ox}}{eE}\sqrt{\left(\frac{mV_{i,ox}}{eE}\right)^2 + \frac{2m\ell_{ix}}{eE}}}{\sum_{i=1}^{N-1}\left\{\sqrt{\left(\frac{mV_{i,ox}}{eE}\right)^2 + \frac{2m\ell_{ix}}{eE}} - \frac{mV_{i,ox}}{eE}\right\}} \qquad (16)$$

式 (16) は，電子の各衝突後の速さ $V_{i,ox}$ および衝突間の距離の電場方向の射影が，電場の強さEによらないという範囲内において，電流の電場の強さへの依存の仕方を explicit に与えるものとみなすことができる。

したがって次に

(II) $V_{i,ox}$ と ℓ_{ix} は，電場の強さによらないということを一つの前提あるいは仮定とした場合の電流 (16) の電場依存性をしらべてみる。ここでは，電場の強さが条件

$$\frac{m}{e}V_{i,ox}^2 \gg eE\ell_{ix} \qquad (17)$$

と

$$\frac{1}{2} m V_{i,ox}^{2} \ll eE\ell_{ix} \tag{18}$$

をみたす二つの場合についてしらべる。

まず条件 (17) がみたされるような電場の強さに対しては，式 (16) の分母分子を

$$\frac{eE\ell_{ix}}{\frac{m}{2} V_{i,ox}^{2}} = \frac{2eE\ell_{ix}}{mV_{i,ox}^{2}}$$

に関して展開してそれぞれ展開の才2項までとすると

$$J = \frac{ne^2E}{2m} \sum_{i=1}^{N-1}\left(\frac{\ell_{ix}}{V_{i,ox}}\right)^2 \Big/ \sum_{i=1}^{N-1}\left(\frac{\ell_{ix}}{V_{i,ox}}\right) \tag{19}$$

となる。

ここで電場にはよらない量とし次のもの

$$2\tau_N \equiv \sum_{i=1}^{N-1}\left(\frac{\ell_{ix}}{V_{i,ox}}\right)^2 \Big/ \sum_{i=1}^{N-1}\left(\frac{\ell_{ix}}{V_{i,ox}}\right) \tag{20}$$

を定義すれば

$$J = \frac{ne^2\tau_N}{m} E \tag{21}$$

となる。

表式 (21) によって表わされる電流が Ohm 電流に他ならない。τ_N は電場によらず，熱平衡状態での性質のみによって決定される緩和時間に相当する。(21) が成立するための条件 (17) は平均としてみるならば，電場によって伝導電子になされる仕事が，電子の熱平衡状態での運動エネルギー（熱エネルギー）よりも小さくなることを表わし，このような電場の強さのもとでは電流は Ohmic になり，その輸送係数は熱平衡状態での量だけによって決定されるという，よく知られた事実がえられるのである。

次に，条件 (18) がみたされるときは同様にして，電流の表式は

$$J = \frac{ne^2\mathbf{E}}{2m}\sqrt{\frac{2m}{eE}}\sum_{i=1}^{N-1}\ell ix \Big/ \sum_{i=1}^{N-1}\sqrt{\ell ix} \tag{22}$$

となる。ここで，又，電場によらない量τ_N'を

$$\zeta_N \equiv \sqrt{\frac{m}{2e}}\sum_{i=1}^{N-1}\ell ix \Big/ \sum_{i=1}^{N-1}\sqrt{\ell ix} \tag{23}$$

で定義すれば，電流は

$$J = \frac{ne^2\zeta_N'}{m}\frac{\mathbf{E}}{\sqrt{E}} \tag{24}$$

で表わされる。

条件(18)は平均としてみるならば，衝突間に電場によって電子になされる仕事が熱平衡状態での電子の熱エネルギーよりも大きい場合に相当し，電場の強さがこのように大きいときには，電流は式(24)のように Ohm の場合からはずれて，電場に関して $E^{1/2}$ に比例するという結果がえられる。

ここでは一般式(16)が特定の条件(17)と(18)をみたす場合の電流の表式を求めた。したがって電場の強さが(17)と(18)で与えられる強さの中間のところでは，電流の電場依存性は(21)や(24)とは異なるものになることが考えられる。

又，条件(18)では電場の強さには上限がないことになるが，だからといって(24)式はどんなに強い電場に対してもなりたつとはいいがたいのである。というのは，ここでは条件(18)のもとで，さらに仮定(II)を用いて，電流の表式(24)を求めたのであって，仮定(II)はどんな強さの電場のもとにおいてもなりたつとは考えられないのみか，むしろ電場の強さにある上限を与えるものであると考えられるからである。実際，実験によれば非常に強い電場のもとでは，電流が飽和することが観測されている。この領域では仮定(II)そのものが破れるものと予想される。

次に，ここでは電子間の相関を無視したことを，もう一度注意しておく。このことは非 Ohm 性電流を与える伝導電子が conduction band にあるものとみなす限りにおいて正当化されるだろう。そうとするならば，ここで導いた非

Ohm 性電流 (24) は格子系よりも電子系が高い温度状態になるからというよりも電子の電場方向の速さが，電場によって平均の熱的な速さよりもずっと大きくなるという，より特殊的な状態によるものであるというようにいうことができるだろう。

実際の半導体についての仮定(I) の成立の根拠および実験および，他の理論の結果との，より定量的な比較については目下検討中である。

有益な批判と議論をしていただきました，富田先生および研究室の皆様に感謝します。

(1) W. Shockley, Bell. Syst. Tech. J. 30 (1951) 990

(2) 黒沢達美　数理科学　2 (1966) 60

(3) J. Yamashita & M. Watanabe, Prog. Theor. Phys. 12 (1954) 443

J. Yamashita, Progress in Semiconductors, vol. 4 (1960) P63